

計算固体力学における検証と妥当性の概念の説明

V&Vとは、Verification&Validationの略で、日本語では検証と妥当性確認と呼ばれている。

Verification（検証）は”the process of determining that a computational model accurately represents the underlying mathematical equations and their solution”と定義されていて、ある問題（入力、荷重条件等）に対し何らかのデータ（出力、はりのたわみ等）を得るために取られたプロセス（計算モデル）が正しいかどうかを確認することである。ここでは、プログラムと計算といった二つのアプローチから行われる。使われた方程式が正しいかという検証に加え、途中でプログラム上のエラーが出なかったか等が検証される。

Validation（妥当性確認）は”the process of determining the degree to which a computational model is an accurate representation of the real world from the perspective of the intended uses of the model”と定義されていて、得られた出力が元々の要求（許容たわみ等）に合致しているか確認することである。

ある現象に対する応答を得る時に、まず対象の数値・実験モデル化を行う。数値モデルに対しては離散化を行い、計算モデルを作成する。そしてその計算モデルを実際に計算を実行し出力を得る。この時、離散化パラメータによって得られた出力が正しいかどうかを計算による検証を行って、その解析パラメータが正しいアルゴリズムによって得られたかどうかをプログラムの検証を行う。

ここで得られた結果や物理パラメータをもとに、実験計画のキャリブレーションを行う。この実験計画をもとに実験結果を得て、不確かさを定量化し比較する。このとき二つの不確かさが計画通りであるか確認が取れたら、次のステップに入ることができる。このとき結果が計画通りでなかった場合は現象のモデルの変更を行う。つまりモデルを設計し直すことにつながる。

Validation（妥当性確認）でまずすべきことは、何をどのくらいの精度で予測するかを定義しておくことである。図2のように、最終的な検証対象を定め（ここでは航空機）、サブシステム、アセンブリ、サブアセンブリ、コンポーネントといったように、構成要素をトップダウンで分解しモデル化していく。ここでは、最終的に翼のたわみ等を検証するためにアルミニウムのはりにモデル化している。

図2のような階層の上位層の不確か性は、

- (a) 実験データが利用可能な層におけるモデルと実験データの不確か性
- (b) 上位層で発生するモデル間の結合のモデル化における不確か性
- (c) モデルへのすべての入力データとモデルの上位層への外挿における不確か性

を組み合わせたものである。

このようにして進めていくV&Vは、今後の設計や開発に役立てるために、文書化する必要がある。実験の結果や使用した式だけではなく、使用した式の理論や、なぜその式を用いたかなども記載しなければならない。さらには、妥当性確認で妥当

性が得られなかった場合のモデルも記載しておくべきである。なぜなら、失敗した経験は成功した経験よりも多くの有用な情報を得られることもあるからである。

V&Vを行う前に必ず計画を立てる。この時に重要となるポイントは、

- (a) トップレベルの現象について
- (b) トップレベルのモデルの使用目的
- (c) 検証階層（図2に示したようなもの）
- (d) 階層内の以下の項目
 - (1) 測定、計算、比較する応答機能、すなわちシステム応答量（SRQS）の選択
 - (2) ソフトウェアエンジニアリング手法及び反復または空間収束チェックを含む検証要件
 - (3) 計算結果を実験測定値と比較する基準
 - (4) モデルの精度要件（妥当性確認の基準）
 - (5) モデルの精度要件が満たされていない場合の、次を取るべき行動方針
 - (6) 実行する検証実験
 - (7) 推定コストとスケジュール
 - (8) プログラムの過程と制限（使用するこれまでの実験データ等）

前述の航空機の例において、トップレベルの現象とは、航空機の翼周りの現象である。これまでの経験より、下位レベルでモデルを検証できないことが、上位モデルでの後続のモデル検証の失敗につながるがあると知られている。したがって、ここでは図2に示したような様々な翼のコンポーネントの中で、アルミニウムのはりについて検証することが決定される。これにより、使用する概念的なモデルが図3に示すように完成する。このモデルを正しく検証できない場合、より上位の階層のサブアセンブリ等の検証はできなくなる。

このとき計算・プログラムの両方によって検証されるが、プログラムの検証の主な必要要件は以下の三つである。

- (a) 妥当性確認のために測定・使用されるものと同じシステム応答量を用いて実施する
- (b) グリッドを精緻化することで、数値アルゴリズムが対象となる現象に近い問題の正しい解に収束することを実証する（実現は困難であるが、これがなければプログラムは正しく検証されない。）
- (c) アルゴリズムが期待された速度で収束することを示している

また、一般的な計算の検証の要件は、対象となる応答の数値誤差（不完全な空間収束または反復収束によるもの）が妥当性確認の要件に比べてごくわずかであることを示すことである。この例では、妥当性確認の要件は10%であり、数値誤差はその2%以下であることが求められる（つまり0.2%）。

妥当性確認の要件は、以下の要素によって決定される。

- (a) 計算モデルの予測精度
- (b) 測定機器の精度、プロジェクトのスケジュール、財源等
- (c) プロジェクトの進捗

(d) エンジニアリングシステムが性能、信頼性、安全性の要求を満たさない場合の結果

一回の実験やシミュレーションのみによって妥当性確認を行う場合、不確かさを見積もる必要がある。このとき、実験・モデリングそれぞれの専門家が過去の関連業務の経験に基づいて、すべての実用的な結果が得られると思われる対称的な区間を推定することが求められる。この時の範囲は Λ によって定められ、 $2\Lambda=6\sigma$ の正規分布に従う。不確かさがこの範囲に存在する確率は約99.7%である。

繰り返し実験やシミュレーションを行う場合、不確かさを持つ実験結果と不確かさを持つ入力によるシミュレーションによって不確かさが定量化される。このとき、確率密度分布は正規分布とは限らず、対称でない可能性もある。これらの概念図は図5に示したとおりである。

これらの確率密度関数を積分したものを累積分布関数という。実験による累積分布関数とシミュレーションによる累積分布関数に挟まれている部分を「エリア」と

$$M^{SRQ} = \frac{1}{|SRQ^{exp}|} \int_{-\infty}^{\infty} |F_{SRQ^{mod}}(y) - F_{SRQ^{exp}}(y)| dy$$

呼ぶ（図6）。

このエリア M^{SRQ} は以下の式によって求められる。

この値は非負であり、二つの確率密度関数が一致している場合は0となる。この式があらわすように、最後に実験結果の平均によって正規化されている。これは、他の検証評価手順では、測定された応答の標準偏差で正規化された値を使用することが推奨されているのと対照的である。

これらの要件は、測定の不確かさの原因や応答に対する入力の不確かさの影響ではなく、設計やシステムの性能要件によって決まっている。